



TITLE:

Tunneling ModelのGreen関数の方法による取り扱い

AUTHOR(S):

川崎, 悦子; 沢田, 克郎

CITATION:

川崎, 悦子 ...[et al]. Tunneling ModelのGreen関数の方法による取り扱い
. 物性研究 1976, 27(3): 55-72

ISSUE DATE:

1976-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89267>

RIGHT:

Tunneling Model の Green 関数の 方法による取り扱い

東京教育大学理学部 川 崎 悦 子
沢 田 克 郎

§ 1. Introduction

Tunneling model は KDP (KH_2PO_4) 型強誘電体, 異方性強磁性体の model として或いは希土類金属中動的ヤーンテラー効果に関連して, 多くの人々によって調べられてきた。形式的にはそのHamiltonian は Ising model に横方向に磁場のかかった形をしている。この model は 2 次相転移を示す。 $\langle S^x \rangle$ は全温度で 0 でないが, $\langle S^z \rangle$ は, 高温では $\langle S^z \rangle = 0$ であり, 臨界温度 T_c 以下で秩序状態になり, $\langle S^z \rangle \neq 0$ となる。即ち, $\langle S^z \rangle$ が *order parameter* になっている。秩序状態は交換相互作用 J から生じ, 2Ω により妨げられる。 2Ω を 0 から増加させると, T_c は Ising model での値から減少し, ある臨界値 Ω_c で 0 になる。 $\Omega > \Omega_c$ では相転移は生じない。

1 次元では, Pfeuty, Katsura, Suzuki らがこの model の正確な性質を調べたが, 2 次元, 3 次元では正確に扱うことはできないので, J の摂動計算に依る。この場合, スピン系では Wick の定理が成立しない為, 摂動計算の為の色々な方法が考えられている。例えば *cumulant* を用いる方法, スピン演算子を Fermi 演算子, Bose 演算子を利用して表わす方法。あるいは, 昇降演算子で表わし, T -積をはずして計算する方法等がある。

どの方法もかなり難解で面倒であるので, ここではそれらとは異なった方法を導いた。スピン演算子を他の演算子に置き換えることなく, 直接計算するやり方で, いままでの方法よりは, 取り扱いが簡単であり, Heisenberg 系への応用も可能と考えられる。

§ 2. Formulation

Green 関数を求めれば, 様々な物理量を得ることができる。我々は Tunneling model

で表わされる系の関数を求めたいのであるが、ここではとりあえず静帯磁率を計算する。この結果はすでに、*Elliott and Wood* (J の 5 次) *Yanase, Takeshige and Suzuki* (J の 7 次) らが求めているが、ここではそれらとは異なるやり方で求め、その方法が正しいことを調べる。*Tunneling model* は、

$$\left. \begin{aligned} H &= H_{\Omega} + H_J \\ H_{\Omega} &= -2\Omega \sum_{i=1}^N S_i^x \\ H_J &= - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z \end{aligned} \right\} \quad (2-1)$$

で表わされる。ここに $\langle i,j \rangle$ はすべての最隣接格子点対についての和である。静帯磁率を計算するために、

$$H_F = -F \sum_{i=1}^N S_i^z \quad (2-2)$$

を (2-1) に加える。*Green* 関数は、

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \tau) &= \frac{1}{N} \langle T(\sum_i e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_i} S_i^z(\tau) \sum_j e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j} S_j^z(0)) \rangle_H \\ &= \frac{1}{N} \frac{T_r(T e^{-\beta H} \sum_i e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_i} S_i^z(\tau) \sum_j e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j} S_j^z(0))}{T_r e^{-\beta H}} \end{aligned} \quad (2-3)$$

と定義されるが、 H_{Ω} を無摂動系、 H_J を摂動として展開すると、

$$\mathcal{G} = \frac{\langle T(e^{-\int_0^{\beta} d\tau' H_J(\tau')} \sum_i e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}_i} S_i^z(\tau) \sum_j e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j} S_j^z(0)) \rangle_0}{N \langle T(e^{-\int_0^{\beta} d\tau' H_J(\tau')}) \rangle_0} \quad (2-4)$$

となる。ここで、

$$S_i^z(\tau) = e^{\tau H_{\Omega}} S_i^z e^{-\tau H_{\Omega}} \quad (2-5)$$

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2}{\partial F^2} (\ell_n \text{Tr} e^{-\beta(-F \sum_i S_i^z + H)})_{F=0} \\
&= \int_0^\beta d\tau \langle T \sum_i S_i^z(\tau) \sum_j S_j^z(0) \rangle_H \\
&= N \int_0^\beta d\tau \mathcal{S}(0, 0, \tau)
\end{aligned} \tag{2-5}$$

と定義され、

$$\chi = N \beta \sum_{n=0}^{\infty} (\beta J)^n \chi_n \tag{2-7}$$

と書いておく。

§ 3. Contraction Rule

静帯磁率 χ を摂動展開して各々の項を求めようとする、スピン演算子の積の期待値を求めることになる。*Fermion* あるいは *Bose* 演算子の積の期待値であれば、*Wick* の定理を用いて、計算すればよいが、スピン演算子については、それは成り立たない。ここでは *Wick* の定理に対応する公式を求め、スピン演算子の期待値を直接計算できるようにする。

$$\begin{aligned}
S_j^z(\tau) &= e^{\tau H_\Omega} S_j^z e^{-\tau H_\Omega} \\
&= \text{ch } 2\Omega\tau S_j^z + i \text{sh } 2\Omega\tau S_j^y
\end{aligned} \tag{3-1}$$

A, B を任意の演算子とすると、Trace の性質を用いて、

$$\begin{aligned}
\langle A S_j^z(\tau) B \rangle &= \langle [A, S_j^z(\tau)] B \rangle \\
&\quad + \langle S_j^z(\tau) A B \rangle \\
&= \langle [A, S_j^z(\tau)] B \rangle
\end{aligned}$$

$$+ \langle A [B, S_j^Z(\tau-\beta)] \rangle + \langle A S_j^Z(\tau-\beta) B \rangle \quad (3-2)$$

が得られる。同様に、

$$\begin{aligned} \langle A S_j^Z(\tau) B \rangle &= \langle A [S_j^Z(\tau), B] \rangle \\ &+ \langle [S_j^Z(\tau+\beta), A] B \rangle + \langle A S_j^Z(\tau+\beta) B \rangle \end{aligned} \quad (3-3)$$

(3-1), (3-2), (3-3) を用いると、

$$\begin{aligned} \langle A S_j^Z(\tau) B \rangle &= \frac{1}{2(1-\text{ch } 2\Omega\beta)} \\ &\times \{ \langle [A, S_j^Z(\tau) - S_j^Z(\tau+\beta)] B \rangle + \langle A [B, S_j^Z(\tau-\beta) - S_j^Z(\tau)] \rangle \} \end{aligned} \quad (3-4)$$

となるが、スピン演算子が沢山ある場合に、(3-4) を用いると、

$$\begin{aligned} \tau_1 &> \tau_2 \\ \langle \text{----- } S_j^Z(\tau_1) \text{ --- } S_k^Z(\tau_2) \text{ -----} \rangle \\ &= \frac{1}{2(1-\text{ch } 2\Omega\beta)} \langle \text{--- } \frac{1}{\tau_1} \text{ --- } [S_k^Z(\tau_2), S_j^Z(\tau_1-\beta) - S_j^Z(\tau_1)] \text{ ---} \rangle \\ &\quad + \text{-----} \\ &= \langle \text{--- } \frac{1}{\tau_1} \text{ --- } \delta_{jk} G_{12} S_j^X(\tau_2) \text{ ---} \rangle + \text{---} \end{aligned} \quad (3-5)$$

$$\begin{aligned} \tau_1 &< \tau_2 \\ \langle \text{--- } S_k^Z(\tau_2) \text{ --- } S_j^Z(\tau_1) \text{ ---} \rangle \\ &= \frac{1}{2(1-\text{ch } 2\Omega\beta)} \langle \text{-- } [S_k^Z(\tau_2), S_j^Z(\tau_1) - S_j^Z(\tau_1+\beta)] \text{ --- } 1 \rangle \\ &\quad + \text{-----} \\ &= \langle \text{--- } \delta_{jk} G_{12} S_j^X(\tau_2) \text{ --- } \frac{1}{\tau_1} \text{ ---} \rangle + \text{-----} \end{aligned} \quad (3-6)$$

$$G_{12} = \frac{1}{2} \operatorname{cth} \beta \Omega \operatorname{ch} 2\Omega (|\tau_1 - \tau_2|) - \frac{1}{2} \operatorname{sh} 2\Omega (|\tau_1 - \tau_2|) \quad (3-7)$$

であり, τ_1, τ_2 の大小関係にかかわらず, 同じ結果が得られるので, T- 積にしても成り立つ。故に,

$$\begin{aligned} & \langle T(S_{j_1}^Z(\tau_1) S_{j_2}^Z(\tau_2) \cdots S_{j_n}^Z(\tau_n)) \rangle \\ &= \sum_{\ell=2}^n G_{1\ell} \delta_{j_1 j_\ell} \langle T(S_{j_2}^Z(\tau_2) \cdots S_{j_\ell}^X(\tau_\ell) \cdots S_{j_n}^Z(\tau_n)) \rangle \end{aligned} \quad (3-8)$$

となり, スピンがすべて同じ場所にあるときは, ただちに,

$$\begin{aligned} & \langle T(S^Z(\tau_1) S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_n)) \rangle \\ &= \sum_{\ell=2}^n G_{1\ell} \langle T(S^Z(\tau_2) \cdots S^X(\tau_\ell) \cdots S^Z(\tau_n)) \rangle \end{aligned} \quad (3-9)$$

となる。

$$[S^Z(\tau_k), S^X] = \frac{1}{2\Omega} \frac{\partial S^Z(\tau_k)}{\partial \tau_k} \quad (3-10)$$

(3-10) をくりかえし用いて, (3-9) の $S^X(\tau_\ell)$ を左側にもってくると,

$$\begin{aligned} & \langle T(S^Z(\tau_2) \cdots S^X(\tau_\ell) \cdots S^Z(\tau_n)) \rangle \\ &= \langle S^X T(S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_{\ell-1}) S^Z(\tau_{\ell+1}) \cdots S^Z(\tau_n)) \rangle \\ &+ \sum_k \frac{1}{2\Omega} \frac{1 + \theta(\tau_k - \tau_\ell)}{2} \frac{\partial}{\partial \tau_k} \\ &\cdot \langle T(S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_{\ell-1}) S^Z(\tau_{\ell+1}) \cdots S^Z(\tau_n)) \rangle \end{aligned} \quad (3-11)$$

任意の演算子 A に対し,

$$\langle S^X A \rangle = (\langle S^X \rangle + \frac{1}{2\Omega} \frac{\partial}{\partial \beta}) \langle A \rangle \quad (3-12)$$

の関係があるから、(3-11)は、

$$\begin{aligned}
 <T(S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_n))> = \\
 &\sum_{\ell=2}^n G_{1\ell} \left(<S^X> + \frac{1}{2\Omega} \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{2\Omega} \sum_k \frac{1+\theta(\tau_k-\tau_\ell)}{2} \frac{\partial}{\partial \tau_k} \right) \\
 &\cdot <T(S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_{\ell-1}) S^Z(\tau_{\ell+1}) \cdots S^Z(\tau_n))>
 \end{aligned} \tag{3-13}$$

となる。 $S^X(\tau_\ell)$ を右側にもってきて、同じことをやると、

$$\begin{aligned}
 <T(S^Z(\tau_1) S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_n))> \\
 &= \sum_{\ell=2}^n G_{1\ell} \left(<S^X> + \frac{1}{2\Omega} \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{2\Omega} \sum_k \frac{1-\theta(\tau_k-\tau_\ell)}{2} \frac{\partial}{\partial \tau_k} \right) \\
 &\cdot <T(S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_{\ell-1}) S^Z(\tau_{\ell+1}) \cdots S^Z(\tau_n))>
 \end{aligned} \tag{3-14}$$

(3-13), (3-14) を加えて 2 で割ると、

$$\begin{aligned}
 <T(S^Z(\tau_1) S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_n))> \\
 &= \sum_{\ell=2}^n G_{1\ell} \left(<S^X> + \frac{1}{2\Omega} \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{4\Omega} \sum_k \theta(\tau_k-\tau_\ell) \frac{\partial}{\partial \tau_k} \right) \\
 &\cdot <T(S^Z(\tau_2) \cdots S^Z(\tau_{\ell-1}) S^Z(\tau_{\ell+1}) \cdots S^Z(\tau_n))>
 \end{aligned} \tag{3-15}$$

が得られる。(3-15) は n 個のスピン演算子の期待値が与えられると、 $n-2$ 個のスピン演算子の 1 次結合で表わされることを示し、この式を何回も用いれば答が得られる。ここで、すぐに解かることは、スピン演算子が奇数個ある場合は 0 になることである。なぜなら (3-15) を用いると、奇数個の演算子は最終的に 1 個になるからで $<S^Z>$ は T_c より高温では 0 であるからだ。

さて、自由な Green 関数 G_{lm} は周期 β の関数であるので、フーリエ級数に展開してから計算すれば便利であろうかと思うが、(3-15) に含まれる階段関数 $\theta(\tau_k-\tau_\ell)$ は周

期が 2β であり、便利とは言えない。そこで τ_k を $\tau_k = \beta x_k$ なる x_k に変数変換をする。スピン演算子の積の期待値は β を含むが、 $\tau_k = \beta x_k$ により、更に多くの β を含むことになり、(3-15) の $\frac{1}{2\Omega} \frac{\partial}{\partial \beta}$ から $\tau_k = \beta x_k$ の β 依存性の分を差し引かねばならない。その結果、

$$\begin{aligned}
 & \langle T(S^z(x_1) S^z(x_2) \cdots S^z(x_n)) \rangle \\
 &= \sum_{\ell=2}^n G_{1\ell} \left\{ \langle S^x \rangle + \frac{1}{2\Omega} \frac{\partial}{\partial \beta} + \sum_j \frac{1}{2\beta\Omega} \left(\frac{1}{2} \theta(x_j - x_\ell) \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - (x_j - x_\ell) \right) \frac{\partial}{\partial x_j} \right\} \langle T(S^z(x_2) \cdots S^z(x_{\ell-1}) S^z(x_{\ell+1}) \cdots S^z(x_n)) \rangle
 \end{aligned} \tag{3-16}$$

となるが、ここで $G_{1\ell}$ は周期 1、 $\frac{1}{2} \theta(x_j - x_\ell) - (x_j - x_\ell)$ もまた周期 1 であり、共にフーリエ級数に展開できる。

$$\begin{aligned}
 G_{j\ell} &= \sum_n G_n e^{i\nu_n(x_j - x_\ell)} \\
 G_n &= \frac{2\beta\Omega}{\nu_n^2 + (2\beta\Omega)^2}, \quad \nu_n = 2n\pi
 \end{aligned} \tag{3-17}$$

$$\frac{1}{2} \theta(x_j - x_\ell) - (x_j - x_\ell) = \sum_{\substack{n \\ (\neq 0)}} \frac{e^{i\nu_n(x_\ell - x_j)}}{(-i\nu_n)} \tag{3-18}$$

(3-18) を (3-16) に代入すると、公式

$$\begin{aligned}
 & \langle T(S^z(x_1) S^z(x_2) \cdots S^z(x_n)) \rangle \\
 &= \sum_{\ell=2}^n G_{1\ell} \left\{ \langle S^x \rangle + \frac{1}{2\Omega} \frac{\partial}{\partial \beta} + \sum_{\substack{j=2 \\ (\neq \ell)}}^n \sum_{\substack{k \\ (\neq 0)}} g_k e^{i\nu_k(x_\ell - x_j)} \frac{\partial}{\partial x_j} \right\} \\
 & \quad \cdot \langle T(S^z(x_2) \cdots S^z(x_{\ell-1}) S^z(x_{\ell+1}) \cdots S^z(x_n)) \rangle \\
 & g_k = -\frac{1}{i\nu_k 2\Omega}
 \end{aligned} \tag{3-19}$$

が得られる。

§ 4. Static Susceptibility

(2-4) に従って静帯磁率を求めると、 T_c より高温では $\langle S^z \rangle = 0$ であり、奇数個のスピンの演算子の期待値は、 $\langle S^z \rangle$ で表わすことができるということから、同じ位置を占めることのできるスピンは偶数個である。 βJ につき 3 次まで展開すると以下のタイプのみが残る。

$$\begin{aligned}
 \chi = N\beta \{ & \left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right| + Z\beta J \left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right| + Z(Z-1) \frac{(\beta J)^2}{2!} \cdot 2! \left| \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right| \quad i \neq k \\
 & + Z \frac{(\beta J)^2}{2!} \left| \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right| \quad + (N-2) Z \frac{(\beta J)^2}{2!} \left| \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right| \quad i \neq j, k \\
 & + Z(Z-1)^2 \frac{(\beta J)^3}{3!} \cdot 3! \left| \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right| \quad i \neq k, j \neq l \\
 & + Z(Z-1) \frac{(\beta J)^3}{3!} \cdot \frac{3!}{2!} \cdot 2 \left| \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right| \quad i \neq k \quad + Z \frac{(\beta J)^3}{3!} \left| \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right| \\
 & + \left(\frac{NZ}{2} - 2Z + 1 \right) Z \frac{(\beta J)^3}{3!} \frac{3!}{2!} \left| \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \quad \bullet \end{array} \right| \quad i, j \neq k, l \quad + \dots \\
 & - \frac{NZ}{2} \frac{(\beta J)^2}{2!} \left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right| \times \left[\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right] - \frac{NZ^2}{2} \cdot \frac{(\beta J)^3}{2!} \left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right| \times \left[\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \right] \dots \} \quad (4-1)
 \end{aligned}$$

・はスピン 1 個を表わし、 $\left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right|$ でつながっているのは同じ位置を占めるスピンであり、

・-----・ は βJ に対応する。Z は最隣接格子数である。

このグラフ中でスピンの 2 個のみ占めるグラフ、即ち $\begin{array}{c} \text{---} x_\ell \\ | \\ x_m \end{array}$ は、

$$\langle T(S^z(x_\ell) S^z(x_m)) \rangle = G(x_\ell, x_m) \langle S^x \rangle \quad (4-2)$$

に対応している。これは、

$$\int_0^1 dx_m G(x_\ell, x_m) \langle S^x \rangle = \frac{\text{th } \beta \Omega}{4 \beta \Omega} \quad (4-3)$$

の関係があるので、積分はただちに得られる。

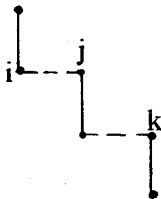
$$\begin{array}{c} | \\ \text{---} \end{array} = \int_0^1 dx G(x, 0) \langle S^x \rangle = \frac{\text{th } \beta \Omega}{4 \beta \Omega} \quad (4-4)$$

$$\begin{array}{c} | \\ \text{---} \text{---} | \end{array} = \iint_0^1 dx dx_1 G(x, x_1) \langle S^x \rangle G(x_1, x_2) \langle S^x \rangle \\ = \left(\frac{\text{th } \beta \Omega}{4 \beta \Omega} \right)^2 \quad (4-5)$$

スピンの 4 個以上占めるグラフはかなり複雑であるので (3-19) を用いて更に分解する。

$$\begin{array}{c} | \\ \text{---} \text{---} \text{---} | \end{array} = \iiint_0^1 dx dx_1 dx_2 \langle T(S^z(x) S^z(x_1) S^z(x_2) S^z(0)) \rangle \langle T(S^z(x_1) S^z(x_2)) \rangle \\ = 2! \begin{array}{c} | \\ \text{---} \text{---} | \\ | \end{array} + \begin{array}{c} | \\ \text{---} \text{---} | \\ | \end{array} + 2! \begin{array}{c} | \\ \text{---} \text{---} | \\ | \end{array} + \begin{array}{c} | \\ \text{---} \text{---} | \\ | \end{array} \quad (4-6)$$

(a)

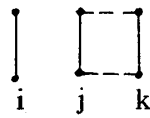


$i \neq k$

(b)

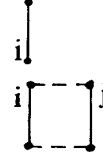


(c)



$i \neq j, k$

(d)



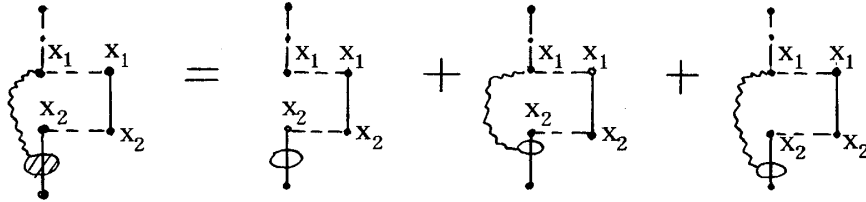
ここで (4-1) 中の (a) と (4-6) 中の (b) との違いについて注意すると, (a) は隣りあった 3 つの格子点にスピンの 2 個ずつ占めているのに対し, (b) は 1 つの格子点にスピンの 4 個, その最隣接格子点にスピンの 2 個占めている。ただし両者共に積分値は同じである。

$$I_{(a)} = I_{(b)} = \iiint_0^1 dx dx_1 dx_2 \langle T(S^z(x) S^z(x_1)) \rangle \langle T(S^z(x_1) S^z(x_2)) \rangle \cdot \langle T(S^z(x_2) S^z(0)) \rangle = \left(\frac{\text{th } \beta \Omega}{4 \beta \Omega} \right)^3 \quad (4-7)$$

(4-1) 中の (c) と (4-6) 中の (d) の関係も (a), (b) の関係と同様である。

$$I_{(c)} = I_{(d)} = \iiint_0^1 dx dx_1 dx_2 \langle T(S^z(x) S^z(0)) \rangle \langle T(S^z(x_1) S^z(x_2)) \rangle^2 = \left(\frac{\text{th } \beta \Omega}{4 \beta \Omega} \right)^2 \left\{ \frac{(\beta \Omega)^2}{2} (\text{cth}^2 \beta \Omega - 1) + \frac{\beta \Omega}{2} \text{cth } \beta \Omega \right\} \quad (4-8)$$

(e)



$$I_{(e)} = \iiint_0^1 dx dx_1 dx_2 G(x, x_1) \{ \Gamma(x_1; x_2, 0) G(x_2, 0) \langle S^x \rangle \cdot G(x_1, x_2) \langle S^x \rangle = \iiint_0^1 dx dx_1 dx_2 G(x, x_1) \left[\left\{ \frac{\partial}{\partial (2 \beta \Omega)} + \sum_{\substack{k \\ (\neq 0)}} g_k (e^{i \nu_k (x_1 - x_2)} - e^{i \nu_k x_1}) \cdot \frac{\partial}{\partial x_2} \right\} G(x_2, 0) \langle S^x \rangle \right] \cdot G(x_1, x_2) \langle S^x \rangle \right] \quad (4-9)$$

ここで $G(x_\ell, x_m)$ を (3-17) に従いフーリエ級数に展開して, x_1, x_2 で積分すると $x_\ell \downarrow \uparrow x_\ell$ での保存則が成り立ち, (e) は (e') のようになる。

(e')

$$I_{(e')} = \int_0^1 dx \sum_n e^{i \nu_n x} \left\{ G_n \frac{\partial (G_n \langle S^x \rangle)}{\partial (2\beta\Omega)} G_n \langle S^x \rangle \right. \\ \left. + G_n \sum_{k \neq 0} g_k (i \nu_n G_n - i \nu_{n-k} G_{n-k}) \langle S^x \rangle G_{n-k} \langle S^x \rangle \right\} \quad (4-10)$$

(4-10) の第2項の $k=0$ に対する項は特異点ではない。だから第2項に $k=0$ を含め、その分差し引いておくと、(4-10) は、

$$I_{(e')} = \int_0^1 dx \sum_n e^{i \nu_n x} \left\{ G_n^2 \langle S^x \rangle \left(\langle S^x \rangle \frac{\partial G_n}{\partial (2\beta\Omega)} + G_n \frac{\partial \langle S^x \rangle}{\partial (2\beta\Omega)} \right) \right. \\ \left. + G_n \sum_k g_k (i \nu_n G_n - i \nu_{n-k} G_{n-k}) \langle S^x \rangle G_{n-k} \langle S^x \rangle \right. \\ \left. - G_n \lim_{k \rightarrow 0} g_k i \nu_k \frac{\partial (\nu_n G_n)}{\partial \nu_n} \langle S^x \rangle G_{n-k} \langle S^x \rangle \right\} \quad (4-11)$$

となる。ここで、

$$\left(\nu_n \frac{\partial}{\partial \nu_n} + 2\beta\Omega \frac{\partial}{\partial (2\beta\Omega)} \right) \nu_n G_n = 0 \quad (4-12)$$

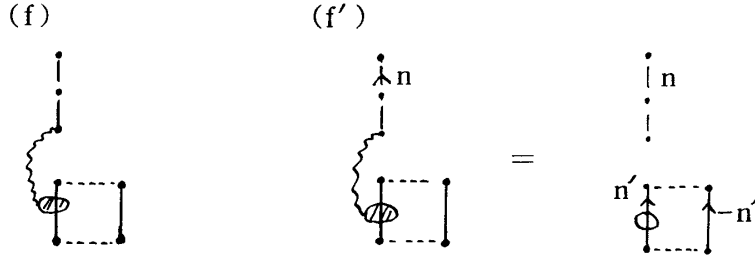
$$\left(\langle S^x \rangle + \frac{\partial}{\partial (2\beta\Omega)} \right) \langle S^x \rangle = \frac{1}{4} \quad (4-13)$$

(4-12), (4-13) を用いると、(4-11) の第1項の一部分が第3項と打ち消しあい、

$$I_{(e')} = \int_0^1 dx \sum_n e^{i \nu_n x} \left\{ G_n^3 \langle S^x \rangle \left(\frac{1}{4} - \langle S^x \rangle^2 \right) \right. \\ \left. + G_n \sum_k g_k (i \nu_n G_n - i \nu_{n-k} G_{n-k}) \langle S^x \rangle G_{n-k} \langle S^x \rangle \right\}$$

$$= \left(\frac{\text{th } \beta \Omega}{4 \beta \Omega} \right)^2 \left\{ \frac{\text{cth } \beta \Omega}{8 \beta \Omega} - \frac{\text{th } \beta \Omega}{4 \beta \Omega} - \frac{1}{8} (\text{cth}^2 \beta \Omega - 1) \right\} \quad (4-14)$$

となる。



(f) も同様にフーリエ級数に展開して積分すると、

$$\begin{aligned} I_{(f)} &= \int_0^1 dx \, dx_1 \, dx_2 \, G(x, 0) \{ \Gamma(0; x_1 x_2) G(x_1, x_2) \langle S^x \rangle \} \\ &\quad \cdot G(x_1, x_2) \langle S^x \rangle \\ &= \int_0^1 dx \sum_n e^{i \nu_n x} G_n \sum_{n'} \frac{\partial (G_{n'} \langle S^x \rangle)}{\partial (2 \beta \Omega)} G_{-n'} \langle S^x \rangle \end{aligned} \quad (4-15)$$

となるが、(4-13) を用いると、

$$\begin{aligned} I_{(f)} &= \int_0^1 dx \sum_n e^{i \nu_n x} G_n \sum_{n'} \left\{ \left(\frac{G_{n'}}{2 \beta \Omega} - 2 G_{n'}^2 \right) \langle S^x \rangle \right. \\ &\quad \left. + G_{n'} \left(\frac{1}{4} - \langle S^x \rangle^2 \right) \right\} G_{n'} \langle S^x \rangle \\ &= \left(\frac{\text{th } \beta \Omega}{4 \beta \Omega} \right)^2 \left\{ \left(\frac{1}{16} - \frac{\beta \Omega}{8} \text{th } \beta \Omega \right) (\text{cth}^2 \beta \Omega - 1) - \frac{\text{cth } \beta \Omega}{16 \beta \Omega} \right\} \end{aligned} \quad (4-16)$$

になる。

静帯磁率の展開式 (4-1) 中のグラフ (a) に注目すると、 $i=k$ は (4-6) 中の (b) に相当している。故にこの (b) を (a) に加えれば、(a) は $i \neq k$ なる制限をはずしてもよいことになる。また (4-1) 中の (c) は i が j, k に重なるのを除くことを要求するが、(4-6) 中の (d) は $i=j$ または $i=k$ を意味しているので、両方を考慮すれば (c)

の i は自由に動けることになり、分母からの $\left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \times \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right]$ と完全に打ち消す。

結局 $(\beta J)^2$ の項を集めると、簡単になり、(2-7) の χ_2 を求めると、

$$\chi_2 = Z^3 \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + Z \left(\left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \frac{1}{2!} \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \right) \quad (4-17)$$

である。

$(\beta J)^2$ の項については、

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] = 3! \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \frac{3!}{2!} \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \\ & + 3! \times 2 \left(\left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \frac{1}{2} \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \right) \\ & + 3! \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \frac{3!}{2!} \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \end{aligned} \quad (4-18)$$

の関係があるので、2次と同様にして、

$$\begin{aligned} \chi_3 = & Z^3 \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + 2 Z^2 \left(\left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \frac{1}{2} \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \right) \\ & + Z \left(\left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] + \frac{1}{2} \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \right) + \dots \end{aligned} \quad (4-19)$$

が得られる。以上の結果をまとめると、静帯磁率は、

$$\begin{aligned}
 \chi = N\beta \left\{ & \text{---} + \beta J Z \text{---} + (\beta J)^2 Z^2 \text{---} \right. \\
 & + (\beta J)^2 Z \left(\text{---} + \frac{1}{2} \text{---} \right) + (\beta J)^3 Z^3 \text{---} \\
 & + 2(\beta J)^3 Z^2 \left(\text{---} + \frac{1}{2} \text{---} \right) \\
 & \left. + (\beta J)^3 Z \left(\text{---} + \frac{1}{2} \text{---} \right) + \text{---} \right\} \quad (4-20)
 \end{aligned}$$

となる。

ここで、

$$\begin{aligned}
 \pi = & \text{---} + (\beta J)^2 Z \left(\text{---} + \frac{1}{2} \text{---} \right) \\
 & + (\beta J)^3 Z \left(\text{---} + \frac{1}{2} \text{---} \right) + \text{---} \quad (4-21)
 \end{aligned}$$

のように π を定義すると、静帯磁率は、

$$\begin{aligned}
 \chi &= N\beta \left((\pi) + (\pi) \text{---} (\pi) + (\pi) \text{---} (\pi) \text{---} (\pi) + \text{---} \right) \\
 &= N\beta \frac{\pi}{1 - \beta J Z \pi} \quad (4-22)
 \end{aligned}$$

のようにまとめられ、 $1/\chi = 0$ より T_c が求められる。

$$1 - \beta J Z \pi = 0 \quad (4-23)$$

から転移温度 T_c を求めようとするとき、 $\frac{4\Omega}{JZ} \leq 0.5$ の範囲では得られなかった。

χ を (4-22) とは別の形で展開する。(2-7) より、

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\chi} &= \frac{1}{N\beta\chi_0 \left\{ 1 + \beta J \frac{\chi_1}{\chi_0} + (\beta J)^2 \frac{\chi_2}{\chi_0} + (\beta J)^3 \frac{\chi_3}{\chi_0} + \dots \right\}} \\
 &= \frac{1}{N\beta\chi_0} \left[1 - \beta J \frac{\chi_1}{\chi_0} - (\beta J)^2 \left\{ \frac{\chi_2}{\chi_0} - \left(\frac{\chi_1}{\chi_0} \right)^2 \right\} \right. \\
 &\quad \left. - (\beta J)^3 \left\{ \frac{\chi_3}{\chi_0} - 2 \frac{\chi_1}{\chi_0} \frac{\chi_2}{\chi_0} + \left(\frac{\chi_1}{\chi_0} \right)^3 \right\} - \dots \right] \quad (4-24)
 \end{aligned}$$

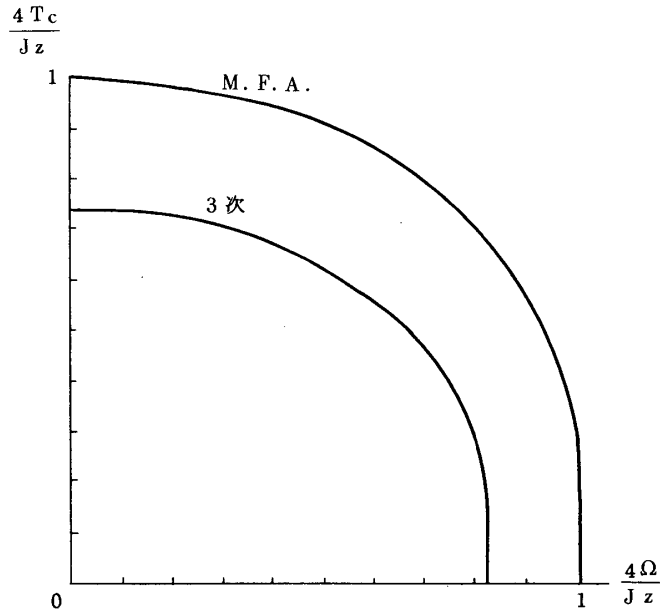
が得られ、すでに求められた $\chi_0, \chi_1, \chi_2, \chi_3$ を代入すると、

$$\chi = \frac{N\beta \frac{\text{th } \beta\Omega}{4\beta\Omega}}{1 - \beta J Z \frac{\text{th } \beta\Omega}{4\beta\Omega} \left\{ 1 + \beta J Y(\beta\Omega) + (\beta J)^2 Z(\beta\Omega) + \dots \right\}} \quad (4-25)$$

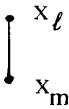
$$Y(\beta\Omega) = \frac{3}{32} \frac{\text{cth } \beta\Omega}{\beta\Omega} - \frac{\text{th } \beta\Omega}{4\beta\Omega} - \left(\frac{3}{32} + \frac{\beta\Omega}{16} \text{th } \beta\Omega \right) (\text{cth}^2 \beta\Omega - 1) \quad (4-26)$$

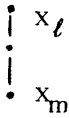
$$Z(\beta\Omega) = \left(\frac{\text{th } \beta\Omega}{4\beta\Omega} \right)^2 - \frac{3}{4} \frac{1}{(4\beta\Omega)^2} + \left(\frac{\text{th } \beta\Omega}{16\beta\Omega} - \frac{1}{64} + \frac{\text{th}^2 \beta\Omega}{64} \right) (\text{cth}^2 \beta\Omega - 1) \quad (4-27)$$

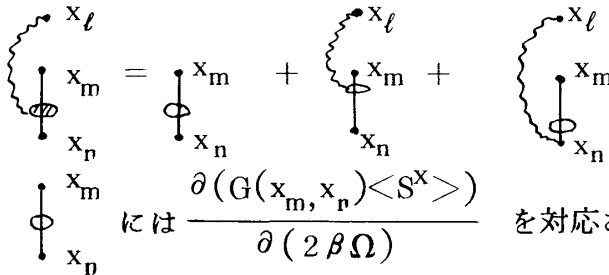
となり $1/\chi=0$ より T_c が得られる。 $z=4$ の場合について下図に書いてみた。

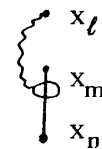


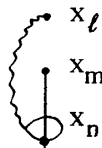
グラフの一般的性質をまとめておく。


1.  には $G(x_l, x_m) \langle S^x \rangle$ を対応させる。


2.  には $G(x_l, x_m)$ を対応させる。

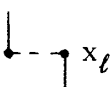
3.  には $\frac{\partial (G(x_m, x_n) \langle S^x \rangle)}{\partial (2\beta\Omega)}$ を対応させる。

 には $\sum_{\substack{k \\ (\neq 0)}} g_k e^{i\nu_k(x_l - x_m)} \frac{\partial G(x_m, x_n)}{\partial x_m} \langle S^x \rangle$ を対応させる。


 には $\sum_{\substack{k \\ (\neq 0)}} g_k e^{i\nu_k(x_l - x_n)} \frac{\partial G(x_m, x_n)}{\partial x_n} \langle S^x \rangle$ を対応させる。


4.  には βJ を対応させる。





5.  の列の数だけ Z をかける。

6. $G(x_l, x_m)$ をフーリエ級数に展開して、 x_l で積分すると、 で保存則が成り立つ。


フーリエ変換すると、1. 2. 3. は以下のように書きなおせる。


7.  n には $G_n \langle S^x \rangle$ が対応する。

8.  n には G_n が対応する。

9.  =  +  + 

には $\frac{\partial (G_n \langle S^x \rangle)}{\partial (2\beta\Omega)}$ が対応する。

 には $\sum_{k \neq 0} g_k i \nu_n G_n \langle S^x \rangle$ が対応する。

 には $\sum_{k \neq 0} g_k (-i) \nu_{n-k} G_{n-k} \langle S^x \rangle$ が対応する。

(4-20) 以前では、計算の都合上、グラフは積分値のみを示し、 βJ , Z などの係数は含まれていない。しかし、(4-20) の段階では、グラフは βJ , Z など自動的を与える。

謝 辞

本稿をまとめるにあたり、高田 慧博士より多くの御援助と助言をうけました。深く感謝の意を表します。

参 考 文 献

- 1) T. Nagamiya, J. Phys. Math. Soc. Japan **24** (1942) 137.
- 2) P. G. De Gennes, Solid State Commun. **1** (1963) 132.
- 3) S. Katsura, Phys. Rev. **127** (1962) 1508.
- 4) R. Brout, K. A. Muller and H. Thomas, Solid State Commun. **4** (1966) 507.
- 5) Y. L. Wang and Cooper, Phys. Rev. **185** (1969) 696.
- 6) P. Pfeuty, Ann. Phys. New York, **57** (1970) 79.
- 7) B. R. Cooper and O. Vogt, J. Phys., Paris **32** (1971) C1-958.
- 8) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **46** (1971) 1337.

- 9) R. J. Elliott and C. Wood, J. Phys. C: Solid St. Phys. **4** (1971) 2359.
- 10) A. Yanase, Y. Takeshige and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Japan (in Press).
- 11) R. B. Stinchcombe, J. Phys. C: Solid State Phys. **6** (1973) 2459.